



Analyse numérique/Probabilités

Analyse de certains schémas de discrétisation pour des équations différentielles stochastiques contraintes [☆]

Tony Lelièvre ^{a,c}, Claude Le Bris ^{a,c}, Eric Vanden-Eijnden ^b

^a CERMICS, École nationale des ponts et chaussées, 77455 Marne-La-Vallée cedex 2, France

^b Courant Institute, 251 Mercer Street, New York, NY 10012, États-Unis

^c INRIA Rocquencourt, MICMAC project, domaine de Voluceau, B.P. 105, 78153 Le Chesnay cedex, France

Reçu le 18 janvier 2008 ; accepté le 18 février 2008

Disponible sur Internet le 21 mars 2008

Présenté par Paul Malliavin

Résumé

Nous étudions différents schémas numériques pour la simulation d'équations différentielles stochastiques contraintes. Nous identifions les cas où les deux approches de « projection puis discrétisation » et « discrétisation puis projection » commutent et ceux où elles ne commutent pas. Nous montrons notamment que, dans certains cas, la seconde approche peut conduire à des schémas non consistants. *Pour citer cet article : T. Lelièvre et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 346 (2008).*

© 2008 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Analysis of some discretization schemes for constrained Stochastic Differential Equations. We study various discretization schemes for constrained Stochastic Differential Equations. We provide conditions for the two approaches “projection and discretization” and “discretization and projection” to commute with one another. In particular, we show situations when the latter approach yields numerical schemes that are not consistent with the continuous problem. *To cite this article : T. Lelièvre et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 346 (2008).*

© 2008 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abridged English version

We are interested in simulating the stochastic differential equation (SDE) (numbered (1) in the French version):

$$d\mathbf{X}_t = b(\mathbf{X}_t) dt + \sigma(\mathbf{X}_t) d\mathbf{W}_t$$

[☆] Les deux premiers auteurs ont bénéficié du support financier du Ministère de la Recherche et des Nouvelles Technologies, dans le cadre de l'action « Nouvelles Interfaces des Mathématiques » Programme SIMUMOL, et de l'Agence Nationale de la Recherche, Programme non thématique INGEMOL. Le troisième auteur a bénéficié des supports financiers suivants : NSF Grant Nos. DMS02-09959 et DMS02-39625, et ONR Gant No. N00014-04-1-0565.

Adresses e-mail : lelievre@cermics.enpc.fr (T. Lelièvre), lebris@cermics.enpc.fr (C. Le Bris), eve2@cims.nyu.edu (E. Vanden-Eijnden).

under the constraint $q(\mathbf{X}_t) = 0$. The constraint q is assumed to be real-valued and non-degenerate and the diffusion $\sigma\sigma^T$ matrix is positive definite. All the stochastic processes manipulated are defined on a filtered probability space $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, \mathbb{P})$, where \mathcal{F}_t is the filtration generated by the Brownian motion \mathbf{W}_t .

Many practical situations require the consideration of such a constrained SDE, for instance in order to avoid explicit treatments of rapid degrees of freedom in molecular dynamics applications.

There are basically two categories of numerical approaches for simulating the constrained equation, namely “projecting the equation and next discretizing the obtained projected SDE”, and “discretizing the unconstrained equation (1) and projecting the numerical scheme”. In the first approach, the constrained stochastic differential equation

$$\begin{cases} d\mathbf{X}_t = b(\mathbf{X}_t) dt + \sigma(\mathbf{X}_t) d\mathbf{W}_t + d\mathbf{Y}_t, \\ q(\mathbf{X}_t) = 0, \end{cases}$$

is first considered. The process \mathbf{Y}_t plays the role of the Lagrange multiplier associated to the constraint. Then the projected stochastic differential equation

$$d\mathbf{X}_t = P(\mathbf{X}_t)(b(\mathbf{X}_t) dt + \sigma(\mathbf{X}_t) d\mathbf{W}_t) - \frac{1}{2} \left(\nabla^2 q : (P\sigma\sigma^T P^T) \frac{D\nabla q}{\|\nabla q\|_D^2} \right) (\mathbf{X}_t) dt,$$

is derived, where D is an arbitrary matrix, and P is the projector onto the tangent space to the submanifold defined by the constraint, defined from D in (5). This equation is next discretized, giving our first scheme

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + P(\mathbf{X}_n)(b(\mathbf{X}_n)\Delta t + \sigma(\mathbf{X}_n)\Delta\mathbf{W}_n) - \frac{1}{2} \left(\nabla^2 q : (P\sigma\sigma^T P^T) \frac{D\nabla q}{\|\nabla q\|_D^2} \right) (\mathbf{X}_n)\Delta t,$$

(labelled (7) in the French version) when the scheme employed is the simple forward Euler scheme. In the second approach, the forward Euler scheme is directly applied to (1), and the projection is then performed, yielding our second scheme, labelled (10) in the French version:

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + b(\mathbf{X}_n)\Delta t + \sigma(\mathbf{X}_n)\Delta\mathbf{W}_n + \lambda S^{-1} \nabla q(\mathbf{X}_{n+1}),$$

where λ is a scalar Lagrange multiplier ensuring $q(\mathbf{X}_{n+1}) = 0$, and S is an arbitrary matrix (with S^{-1} playing at the discrete level a role similar to D).

The purpose of this Note is to investigate whether the two approaches commute, in the limit Δt goes to 0, and understand how the stochastic setting makes this problem specific, as compared to the same well documented problem for ordinary differential equations (ODEs) (see e.g. [4]). It is shown that there is a non-trivial condition (precisely stated in Lemma 3.1) that characterizes the equivalence of the two approaches in the limit of a vanishing timestep. It is then investigated under which circumstances this condition hold true irrespective of the drift b , the constraint q and the diffusion σ . This is the purpose of Proposition 3.1. In particular, the result implies that a) the approach consisting in ‘discretizing the unconstrained equation (1) and projecting the numerical scheme’ is not necessarily consistent with the original equation, and that b) there is no condition for the equivalence of the approaches, irrespective of σ (when $\sigma \neq 0$). A variant (see (11)) of the scheme (10) is also considered. It is called non-anticipative for reasons that are made clear in the French version. Then, the comparison with (7), performed in Proposition 3.2, shows that some condition on the commutation of the two approaches holds true uniformly in b , q and σ . In this case, the situation is therefore similar to the deterministic setting ($\sigma = 0$). Possible tracks for further research are finally indicated.

1. Introduction

Nous nous intéressons dans cette Note à la simulation numérique d’une équation différentielle stochastique dans \mathbb{R}^n

$$d\mathbf{X}_t = b(\mathbf{X}_t) dt + \sigma(\mathbf{X}_t) d\mathbf{W}_t \tag{1}$$

qu’on soumet à la contrainte

$$q(\mathbf{X}_t) = 0. \tag{2}$$

Ci-dessus, la fonction q figurant la contrainte est à valeurs réelles, et supposée non dégénérée au sens où $\nabla q(\mathbf{X})$ ne s’annule pour aucun \mathbf{X} tel que $q(\mathbf{X}) = 0$. Nous supposons aussi que la matrice de diffusion $\sigma\sigma^T$, de taille $n \times n$, reste définie positive. Tous les processus stochastiques que nous manipulerons sont définis sur un espace de probabilité

$(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, \mathbb{P})$, où \mathcal{F}_t est la filtration engendrée par le mouvement Brownien \mathbf{W}_t . Le cas $\sigma = 0$ correspond au cas d'une équation différentielle ordinaire $\dot{\mathbf{X}} = b(\mathbf{X})$.

Nous souhaitons comprendre si les deux techniques de discrétisation de (1), (2), consistant respectivement à « projeter puis discrétiser » et « discrétiser puis projeter » commutent ou non dans la limite d'un pas de temps de discrétisation tendant vers zéro, et quelles conditions doivent être réunies pour qu'elles le fassent. Nous voulons en particulier illustrer les spécificités de cette question dans le cadre stochastique ci-dessus, par comparaison au cadre déterministe ($\sigma = 0$) et à la problématique bien documentée des équations algèbro-différentielles (voir par ex. [4]).

Signalons que nombreuses sont les situations pratiques où des systèmes du type (1), (2) doivent être simulés. Typiquement une contrainte comme (2) peut être appliquée pour réduire le nombre de degrés de liberté dans un système. Ceci est par exemple le cas en dynamique moléculaire (la contrainte permet de substituer une liaison rigide à une liaison atomique fortement oscillante, ou de fixer une coordonnée de réaction) où on utilise la dynamique (1), (2), avec $b = -\nabla V$ and $\sigma = \sqrt{2\beta^{-1}}$, pour approcher en temps long la mesure canonique $d\mu(\mathbf{X}) = \exp(-\beta V(\mathbf{X})) d\mathbf{X}$ restreinte à la sous-variété $\Sigma = \{\mathbf{X}, q(\mathbf{X}) = 0\}$ (cf. [8,1]). Un autre cas (voir [6, chapter 5], [7, chapters 3,4], [5, chapters 3,4]) est celui de la simulation de flots de cristaux liquides où le système est typiquement $d\mathbf{X}_t = -H(\mathbf{X}_t - \mathbf{Y}_0) + \sigma d\mathbf{W}_t$, où \mathbf{Y}_0 est la position d'un point fixe, sous la contrainte de norme $\|\mathbf{X}_t\|^2 = 1$. En pratique, une équation projetée comme

$$d\mathbf{X}_t = \left(\text{Id} - \frac{\mathbf{X}_t \otimes \mathbf{X}_t}{\|\mathbf{X}_t\|^2} \right) (-H(\mathbf{X}_t - \mathbf{Y}_0) + \sigma d\mathbf{W}_t) - \frac{n-1}{2} \sigma^2 \frac{\mathbf{X}_t}{\|\mathbf{X}_t\|^2} dt \tag{3}$$

est utilisée.

2. Deux approches : projection puis discrétisation, ou le contraire

Dans la première approche, « projection puis discrétisation », nous commençons par introduire un processus \mathbf{Y}_t (jouant le rôle de multiplicateur de la contrainte) et considérer

$$\begin{cases} d\mathbf{X}_t = b(\mathbf{X}_t) dt + \sigma(\mathbf{X}_t) d\mathbf{W}_t + d\mathbf{Y}_t, \\ q(\mathbf{X}_t) = 0. \end{cases} \tag{4}$$

Nous supposons que $q(\mathbf{X}_0) = \mathbf{Y}_0 = 0$, \mathbf{Y}_t est \mathcal{F}_t -adapté et nous écrivons $d\mathbf{Y}_t = dA_t + S_t d\mathbf{W}_t$, où A_t est un processus à variation finie et S_t vérifie $\int_0^T S_t^2 dt < \infty$ presque sûrement, pour tout $T > 0$.

Un calcul d'Itô montre facilement que $d(q(\mathbf{X}_t)) = 0$ impose les deux conditions

$$\begin{cases} (S_t + \sigma(\mathbf{X}_t))^T \nabla q(\mathbf{X}_t) = 0, \\ (b(\mathbf{X}_t) dt + dA_t) \cdot \nabla q(\mathbf{X}_t) = -\frac{1}{2} \nabla^2 q : (\sigma + S) (\sigma + S)^T dt, \end{cases}$$

lesquelles ne sont pas suffisantes pour déterminer entièrement S_t et A_t , et donc \mathbf{Y}_t (on a noté $A : B = A_{i,j} B_{i,j}$ le produit contracté de deux matrices A et B). Une condition additionnelle doit être imposée, et il est courant (sur la base d'un argument motivé par un raisonnement de mécanique classique pour certaines applications, voir [5, p. 70]) de choisir la condition $A_t dt$ et $S_t d\mathbf{W}_t$ sont tous les deux colinéaires à une direction $D(\mathbf{X}_t) \nabla q(\mathbf{X}_t)$, où $D(\mathbf{X}_t)$ est une matrice symétrique définie positive arbitraire de taille $n \times n$ (on peut penser à l'identité). On introduit alors le projecteur $P(\mathbf{X})$ sur $\nabla q(\mathbf{X})^\perp$ associé à cette matrice D :

$$P(\mathbf{X}) = \text{Id} - \frac{D(\mathbf{X}) \nabla q(\mathbf{X}) \otimes \nabla q(\mathbf{X})}{\|\nabla q(\mathbf{X})\|_D^2}, \tag{5}$$

où on note désormais $\|\mathbf{Y}\|_S^2 = \mathbf{Y} \cdot (S\mathbf{Y})$. Utilisant que $P(\mathbf{X}_t) d\mathbf{Y}_t = 0$, on peut alors entièrement déterminer S_t et A_t :

$$\begin{aligned} S_t &= (P(\mathbf{X}_t) - \text{Id}) \sigma(\mathbf{X}_t), \\ dA_t &= \left(1 - \frac{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 q}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{X}_t) (P(\mathbf{X}_t) \sigma(\mathbf{X}_t))_{i,k} (P(\mathbf{X}_t) \sigma(\mathbf{X}_t))_{j,k}}{(P(\mathbf{X}_t) - \text{Id}) b(\mathbf{X}_t) \cdot \nabla q(\mathbf{X}_t)} \right) (P(\mathbf{X}_t) - \text{Id}) b(\mathbf{X}_t) dt. \end{aligned}$$

En utilisant le fait que $\frac{(P-\text{Id})b}{(P-\text{Id})b \cdot \nabla q} = \frac{D \nabla q}{\|\nabla q\|_D^2}$, l'équation projetée obtenue est donc

$$d\mathbf{X}_t = P(\mathbf{X}_t) (b(\mathbf{X}_t) dt + \sigma(\mathbf{X}_t) d\mathbf{W}_t) - \frac{1}{2} \left(\nabla^2 q : (P \sigma \sigma^T P^T) \frac{D \nabla q}{\|\nabla q\|_D^2} \right) (\mathbf{X}_t) dt. \tag{6}$$

Remarque 1. L'équation (6) peut se réécrire en utilisant une intégrale de Stratonovitch :

$$d\mathbf{X}_t = P(\mathbf{X}_t)b(\mathbf{X}_t) dt + P(\mathbf{X}_t) \circ P(\mathbf{X}_t)\sigma(\mathbf{X}_t) d\mathbf{W}_t,$$

où il apparait clairement que $dq(\mathbf{X}_t) = 0$.

Il reste alors à discrétiser cette équation projetée et nous employons ici le schéma d'Euler explicite

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + P(\mathbf{X}_n)(b(\mathbf{X}_n)\Delta t + \sigma(\mathbf{X}_n)\Delta \mathbf{W}_n) - \frac{1}{2} \left(\nabla^2 q : (P\sigma\sigma^T P^T) \frac{D\nabla q}{\|\nabla q\|_D^2} \right) (\mathbf{X}_n)\Delta t, \quad (7)$$

où Δt désigne le pas de temps, et $\Delta \mathbf{W}_n = \mathbf{W}_{(n+1)\Delta t} - \mathbf{W}_{n\Delta t}$.

Notre seconde approche, « discrétisation puis projection », consiste à d'abord discrétiser (1) par le schéma d'Euler explicite, puis à projeter l'itéré $\tilde{\mathbf{X}}_{n+1}$ obtenu sur la variété définissant la contrainte, c'est-à-dire :

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{X}}_{n+1} = \mathbf{X}_n + b(\mathbf{X}_n)\Delta t + \sigma(\mathbf{X}_n)\Delta \mathbf{W}_n, \\ \mathbf{X}_{n+1} = Q(\tilde{\mathbf{X}}_{n+1}). \end{cases} \quad (8)$$

Ici, Q désigne une projection particulière sur $q(\mathbf{X}) = 0$, et un exemple souvent employé en pratique est

$$Q_S(\mathbf{X}) = \arg \min \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\|_S^2, \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n, q(\mathbf{Y}) = 0 \right\}, \quad (9)$$

où S est une matrice symétrique définie positive. Le schéma (8), (9) ci-dessus se récrit alors

$$\begin{cases} \mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + b(\mathbf{X}_n)\Delta t + \sigma(\mathbf{X}_n)\Delta \mathbf{W}_n + \lambda S^{-1} \nabla q(\mathbf{X}_{n+1}), \\ \text{où } \lambda \in \mathbb{R} \text{ est tel que } q(\mathbf{X}_{n+1}) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

La matrice S peut éventuellement dépendre de n , mais on lui demande d'être \mathcal{F}_{t_n} mesurable. En pratique, pour que (10) soit consistant avec (6) on observera qu'alors S s'écrit

$$S = S(\mathbf{X}_n).$$

Celui-ci sera notre deuxième schéma (qui sera comparé au premier, (7), dans le Lemme 3.1 et la Proposition 3.1).

Remarque 2. Le schéma (10) a deux avantages par rapport au schéma (7). Tout d'abord, il permet de satisfaire exactement la contrainte $q(\mathbf{X}) = 0$, ce qui est important pour des calculs en temps longs utilisés notamment dans l'échantillonnage de mesures sur des sous-variétés (cf. [1]). De plus, dans le cas où l'équation (1) est raide (penser par exemple à (3) avec H grand), on peut utiliser dans la première étape (pas non-projeté) des schémas adaptés permettant d'assurer la stabilité du schéma (par exemple des méthodes de type Rosenbrock).

Pour illustrer l'impact du caractère stochastique, nous considérerons aussi un troisième schéma (qui sera comparé à (7) dans la Proposition 3.2), obtenu à partir de (10) en remplaçant $\nabla q(\mathbf{X}_{n+1})$ par $\nabla q(\mathbf{X}_n)$ (ce qui diminue le caractère implicite du schéma et peut donc être une stratégie adoptée en pratique) :

$$\begin{cases} \mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + b(\mathbf{X}_n)\Delta t + \sigma(\mathbf{X}_n)\Delta \mathbf{W}_n + \lambda S^{-1} \nabla q(\mathbf{X}_n), \\ \text{où } \lambda \in \mathbb{R} \text{ est tel que } q(\mathbf{X}_{n+1}) = 0. \end{cases} \quad (11)$$

3. Comparaison des schémas

3.1. Comparaison de (7) et (10)

Nous examinons la limite $\Delta t \rightarrow 0$ pour les deux schémas (7) et (10). Le lemme suivant est la base de nos principaux résultats.

Lemme 3.1. *Fixons b , σ , q , D et S . Alors les schémas (7) et (10) convergent vers la même limite quand $\Delta t \rightarrow 0$ si et seulement si les deux conditions suivantes sont remplies :*

$$\frac{S^{-1}(\nabla q \otimes \nabla q)}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^2} \sigma = \frac{D(\nabla q \otimes \nabla q)}{\|\nabla q\|_D^2} \sigma, \tag{12}$$

$$\begin{aligned} & \frac{S^{-1} \nabla q \otimes \nabla q}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^2} b + \frac{3}{2} \nabla q^T S^{-1} \nabla^2 q S^{-1} \nabla q \|\sigma^T \nabla q\|^2 \frac{S^{-1} \nabla q}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^6} - 2(\nabla q)^T \sigma \sigma^T \nabla^2 q S^{-1} \nabla q \frac{S^{-1} \nabla q}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^4} \\ & + \frac{1}{2} \nabla^2 q : (\sigma \sigma^T) \frac{S^{-1} \nabla q}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^2} + \frac{S^{-1} \nabla^2 q \sigma \sigma^T \nabla q}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^2} - \frac{\|\sigma^T \nabla q\|^2}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^4} S^{-1} \nabla^2 q S^{-1} \nabla q \\ & = \frac{D \nabla q \otimes \nabla q}{\|\nabla q\|_D^2} b + \frac{1}{2} (\nabla q)^T D \nabla^2 q D \nabla q \|\sigma^T \nabla q\|^2 \frac{D \nabla q}{\|\nabla q\|_D^6} \\ & - (\nabla q)^T \sigma \sigma^T \nabla^2 q D \nabla q \frac{D \nabla q}{\|\nabla q\|_D^4} + \frac{1}{2} \nabla^2 q : (\sigma \sigma^T) \frac{D \nabla q}{\|\nabla q\|_D^2}. \end{aligned} \tag{13}$$

La preuve n’est pas difficile mais fastidieuse. Elle repose sur la détermination du développement limité (en $\sqrt{\Delta t}$ et jusqu’à l’ordre $o(\Delta t)$) du multiplicateur λ figurant dans (10) en fonction des paramètres du problème. Ce développement est obtenu en résolvant $q(\mathbf{X}_{n+1}) = 0$ pour Δt petit. En identifiant les développements limités à l’ordre $\sqrt{\Delta t}$ et Δt , les conditions (12), (13) s’ensuivent.

Remarque 3. Dans le cas $\sigma = 0$ (cas d’une équation différentielle *ordinaire*), on notera que les conditions (12), (13) se réduisent à $\frac{S^{-1} \nabla q \otimes \nabla q}{\|\nabla q\|_{S^{-1}}^2} b = \frac{D \nabla q \otimes \nabla q}{\|\nabla q\|_D^2} b$.

A partir du Lemme 3.1, on obtient facilement :

Proposition 3.1. (i) Fixons σ . Les deux schémas convergent vers la même limite, pour tout b et pour toute contrainte q , si et seulement si la condition suivante est satisfaite (où $\|\cdot\|$ est une norme matricielle quelconque) : $S^{-1} / \|S^{-1}\| = \sigma \sigma^T / \|\sigma \sigma^T\| = D / \|D\|$.

(ii) En particulier, il n’est pas possible de trouver S et D tel qu’on obtient la même limite pour les deux schémas pour tout b, q et σ .

Nous savons que la limite du schéma (7) est la solution de (6). Il s’ensuit que nous savons, par le lemme et la proposition ci-dessus, à quelles conditions le schéma (10) est consistant avec l’équation (6) dans la limite $\Delta t \rightarrow 0$.

3.2. Comparaison de (7) et (11)

Nous considérons maintenant (11) au lieu de (10). Nous avons, par application des mêmes raisonnements qu’à la section précédente le résultat suivant :

Proposition 3.2. (i) Fixons q . Les deux schémas (7) et (11) convergent vers la même limite quand $\Delta t \rightarrow 0$, pour tout b et σ , si et seulement si $S^{-1} \nabla q / \|\nabla q\|_{S^{-1}}^2 = D \nabla q / \|\nabla q\|_D^2$.

(ii) Cette limite est la même pour tout b, q et σ si et seulement si $S^{-1} / \|S^{-1}\| = D / \|D\|$.

On a donc ici exactement le même résultat que dans le cas des équations différentielles *ordinaires*, pour (11). La difficulté dans (10) provient donc du caractère « anticipatif » du terme $\nabla q(\mathbf{X}_{n+1})$.

Remarque 4. On peut penser à une deuxième variante du schéma avec projection, où on remplace $\nabla q(\mathbf{X}_{n+1})$ dans (10) par $\nabla q(\tilde{\mathbf{X}}_{n+1})$. Dans ce cas, on peut vérifier par des calculs similaires qu’il n’est pas possible de choisir D et S de telle sorte que le schéma soit consistant avec (7) pour tout b et q , à σ fixé (non nul). Le choix du point où la normale ∇q est calculée est donc crucial.

4. Remarques finales

L'analyse ci-dessus peut être prolongée dans plusieurs directions.

D'abord, toujours pour le système (1), (2), on peut chercher à connaître l'ordre de convergence des schémas de discrétisation (10), et respectivement (11), quand ils sont consistants. Cela requiert de pousser aux ordres supérieurs en $\sqrt{\Delta t}$ le développement limité fait ci-dessus pour la consistance (cf. [2,3]).

Ensuite, on peut examiner le même type de questions pour une équation différentielle stochastique qui serait contrainte *en espérance* ($\mathbb{E}(q(\mathbf{X}_t)) = 0$) remplaçant (2). On pourrait aussi le faire pour une équation contrainte presque sûrement, comme (1), (2), mais avec une contrainte *stochastique* ($q(\omega_1, \mathbf{X}_t(\omega_2)) = 0$) remplaçant (2).

Cette Note ne constitue qu'une première étape dans l'étude de ce type de problèmes, tous d'un grand intérêt pratique.

Références

- [1] G. Ciccotti, T. Lelièvre, E. Vanden-Eijnden, Projection of diffusions on submanifolds: Application to mean force computation, *Comm. Pure Appl. Math.* 61 (3) (2008) 371–408.
- [2] G. Ciccotti, E. Vanden-Eijnden, Second-order integrators for Langevin equations with holonomic constraints, *Chem. Phys. Lett.* 429 (1–3) (2006) 310–316.
- [3] E. Faou, T. Lelièvre, Conservative stochastic differential equations: Mathematical and numerical analysis, preprint, 2008.
- [4] E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II*, Springer, 2002.
- [5] D.C. Morse, Theory of constrained Brownian motion, *Adv. Chem. Phys.* 128 (2004) 65–189.
- [6] H.C. Öttinger, *Stochastic Processes in Polymeric Fluids*, Springer, 1995.
- [7] F. Peters, *Polymers in flow, modelling and simulation*, PhD thesis, TU Delft, 2000.
- [8] J.P. Ryckaert, G. Ciccotti, H.J.C. Berendsen, Numerical integration of the Cartesian equations of motion of a system with constraints: Molecular dynamics of *n*-alkanes, *J. Comput. Phys.* 23 (1977) 327–342.